

## GRADO EN QUÍMICA

### DATOS DE LA ASIGNATURA

ASIGNATURA	COMPUTATIONAL CHEMISTRY	SUBJECT	COMPUTATIONAL CHEMISTRY
CÓDIGO	757509318		
MÓDULO	COMPLEMENTARIO	MATERIA	FÍSICA
CURSO	4 <sup>º</sup>	CUATRIMESTRE	2 <sup>º</sup>
CARÁCTER	OPTATIVA	CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

### DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS

	TOTAL	TEÓRICOS GRUPO GRANDE	TEÓRICOS GRUPO REDUCIDO	PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA	PRÁCTICAS DE LABORATORIO	PRÁCTICAS DE CAMPO
ECTS	3	2.07	0.93	0	0	0

### DATOS DEL PROFESORADO

#### COORDINADOR

NOMBRE	FRANCISCO PÉREZ BERNAL		
DEPARTAMENTO	CIENCIAS INTEGRADAS		
ÁREA DE CONOCIMIENTO	FÍSICA APLICADA		
UBICACIÓN	CC. EXPERIMENTALES MÓDULO 1 PLANTA 4 DESPACHO 9		
CORREO ELECTRÓNICO	francisco.perez@dfaie.uhu.es	TELÉFONO	959219789
URL WEB		CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

### DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA ASIGNATURA

#### DESCRIPCIÓN GENERAL

The present module aims to introduce students to some basic techniques for scientific programming and data analysis, working with *free software* applications in a GNU/Linux operating system environment. This is a very practical subject where students will carry out basic calculations, preferably in problems of molecular or atomic physics, though depending of their background the development of applications in other fields is also possible. No prerequisites are defined to join this course apart from the fact that students should bring their laptops with them to class. The required software will be installed in their own computers. Students are expected to attend classes regularly and I highly encourage in-class participation as it can make a difference in the final grade.

#### ABSTRACT

The present module aims to introduce students to some basic techniques for scientific programming and data analysis, working with free software apps in a GNU/Linux operating system environment. This is a very practical subject where students will carry out basic calculations, preferably in problems of molecular or atomic physics, though depending of their background the development of projects in other fields is also possible.

#### OBJETIVOS: RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

After completing this course students will be able to:

- demonstrate basic skills in GNU/Linux at the user and system administration level, with particular emphasis on a terminal approach rather than using GUI's.
- demonstrate basic user skills on several different applications of interest to chemists and scientists in general (e.g. LaTeX, Xmgrace, git, Inkscape etc.)
- apply basic programming skills using a modern language such as Fortran 90 or Python. Depending on students' background and interests, other programming languages, like Perl or GNU R, could be addressed.
- use the Python library pandas or GNU R for statistics and data treatment.
- apply the aforementioned tools to atomic or molecular physics problems or other scientific problems, in accordance with the student's background.

### REPERCUSIÓN EN EL PERFIL PROFESIONAL

This course will provide to the students a basic introduction to programming, basic knowledge of GNU/Linux OS and the basic tools to perform calculations, treat results and present them effectively.

### RECOMENDACIONES AL ALUMNADO

There are no prerequisites apart from the fact that students should bring their laptops with them to class. Students are expected to attend classes regularly and I highly encourage in-class participation. It can make a difference in the final grade.

### COMPETENCIAS

#### COMPETENCIAS BÁSICAS

CB1 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

B1 - Capacidad de análisis y síntesis.

B2 - Capacidad de organización y planificación.

B3 - Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.

B4 - Conocimiento de una lengua extranjera.

B5 - Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/conocimiento.

B6 - Resolución de problemas.

B7 - Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.

B8 - Trabajo en equipo.

B9 - Razonamiento crítico.

B10 - Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.

B11 - Sensibilidad hacia temas medioambientales.

B12 - Compromiso ético.

#### COMPETENCIAS GENERALES



Universidad  
de Huelva

# GUÍA DOCENTE

Curso 2021/2022



CG1 - Que los estudiantes hayan desarrollado y demostrado poseer habilidades de aprendizaje y conocimientos procedentes de su campo de estudio, siendo capaces de aplicarlos en su trabajo, interpretando datos relevantes para emitir juicios de temas de diversa índole pudiendo transmitirlos a un público tanto especializado como no especializado.

## COMPETENCIAS TRANSVERSALES

## COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

C6 - Conocer los principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.

Q2 - Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

Q5 - Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.

Q6 - Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.

P5 - . Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

## TEMARIO Y DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

### TEORÍA

- 1.- Basic user and admin concepts in GNU/Linux. 7 hours
- 2.- Introduction to scientific programming. 10 hours
- 3.- Basic calculations. Application to problems of interest. 8 hours
- 4.- Scientific Applications in GNU/Linux. 5 hours

## METODOLOGÍA DOCENTE

Grupo grande

- Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.
- Seminarios y conferencias sobre temas específicos de los contenidos propios de la asignatura, presentación de material de video y multimedia para ilustrar temas del programa teórico.
- Seminarios tutorizados de resolución de problemas y de supuestos prácticos.
- Realización de presentaciones por los estudiantes de aspectos relativos al temario de la asignatura.
- Seguimiento de otras tareas que se les asignen.
- Resolución de dudas.
- Empleo de páginas Web como apoyo a la docencia de la materia.



Universidad  
de Huelva

# GUÍA DOCENTE

Curso 2021/2022



Grupo reducido

- Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.
- Seminarios y conferencias sobre temas específicos de los contenidos propios de la asignatura, presentación de material de video y multimedia para ilustrar temas del programa teórico.
- Seminarios tutorizados de resolución de problemas y de supuestos prácticos.
- Realización de presentaciones por los estudiantes de aspectos relativos al temario de la asignatura.
- Cualquier actividad dirigida que ayude a la adquisición de conocimientos, habilidades y destrezas.
- Resolución de dudas.
- Empleo de páginas Web como apoyo a la docencia de la materia.

## CRONOGRAMA ORIENTATIVO I

SEMANAS (S):	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
GRUPO GRANDE	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
GRUPO REDUCIDO															
PRÁCTICAS DE LABORATORIO															
PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA															
PRÁCTICAS DE CAMPO															

## EVALUACIÓN DE LA ASIGNATURA

PRIMERA EVALUACIÓN ORDINARIA (FEBRERO/JUNIO)

### EVALUACIÓN CONTINUA

The final grade will be computed as the sum of the following components:

20% Moodle Assignments on GNU/Linux

30% Moodle Assignments on Python

10% Moodle Assignments on Git and LaTeX

20% Student final project memory.

20% Student presentation of the memory of his final project in the classroom.

No minimal grading in the items is required.

### EVALUACIÓN FINAL

Those students that have not properly followed the course or those that choose to have a single assessment will sit a final exam.

The final exam will be the only component of the grade and it will consist on some practical exercises on the different topics covered in the course.

¿Contempla una evaluación parcial?

NO

### SEGUNDA EVALUACIÓN ORDINARIA

Those students that have failed in the final project can repeat it and hand over a memory and defend it in a presentation. The final grade will be computed as 60% average of Moodle Assignments plus 40% student final project memory and defense.

Also students could be evaluated with an exam. In this case the exam will be a 100% of the grade and it consists on some practical exercises on the different topics covered in the course.

### TERCERA EVALUACIÓN ORDINARIA Y OTRAS EVALUACIONES

In this case students will sit an exam that will be a 100% of the grade and that consists on some practical exercises on the different topics covered in the course imparted the previous academic year..

### OTROS CRITERIOS DE EVALUACIÓN

¿Contempla la posibilidad de subir nota una vez realizadas las pruebas?

NO

Requisitos para la concesión de matrícula de honor

Those established in the University of Huelva academic regulations.

### REFERENCIAS

#### BÁSICAS

Wes McKinney. *Python for Data Analysis*. Ed. O'Reilly. 2013.

David B. Cook. *Handbook of Computational Chemistry*. Ed. Dover 2005.

#### ESPECÍFICAS

Stephen J. Chapman. *Fortran 95-2003 for Scientists and Engineers*. Ed. Mc Graw-Hill 2008.

Michael Metcalf. *Modern Fortran Explained*. Ed. Oxford University Press 2011.

Peter F. Bernath. *Spectra of Atoms and Molecules*. Ed. Oxford University Press. 2005.

Jeffrey I. Steinfeld. *Molecules and Radiation*. Ed. Dover. 2005.

### OTROS RECURSOS

Students can find in the Moodle site for this course many links to documents and other material of interest for the different topics treated.